



TITLE:

二時間グリーン函数の理論とその 応用(II)(講義ノート)

AUTHOR(S):

松原, 武生

CITATION:

松原, 武生. 二時間グリーン函数の理論とその応用(II)(講義ノート). 物性研究 1963, 1(3): 238-248

ISSUE DATE:

1963-12-10

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85522>

RIGHT:

二時間グリーン函数の理論とその応用 (Ⅱ)

松原武生 (京大理)

§ 4. 調和振子の系 (続)

(ii) 非調和振動の影響

次に結合した調和振子の系が弱い非調和力をも受けている場合を例にとろう。 i 番目の振子の変位を x_i として系のエネルギーを

$$H = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{x}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} c_{ij} x_i x_j + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} d_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (4.13)$$

とする。まず有効質量 m_i を次の置換で消去する

$$\sqrt{m_i} x_i = y_i, \quad \frac{c_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}} = C_{ij}, \quad \frac{d_{ijk}}{\sqrt{m_i m_j m_k}} = D_{ijk}$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \dot{y}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} y_i y_j + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} D_{ijk} y_i y_j y_k + \dots$$

(i) で述べたように調和振動の範囲では、どのような座標から出発してもグリーン函数の方法は同じ結論に導くけれども、ハミルトニアンを最初に“対角化”しておくのが形式としては一番簡単であつた。だから y_i の適当な一次変換を選んで H の二次形式の部分を標準型に変えておくのがよい。基準座標 ξ_λ を

$$y_i = \sum_\lambda S_{i\lambda} \xi_\lambda$$

$$\sum_i S_{i\lambda} S_{i\mu} = \delta_{\lambda\mu}, \quad \sum_{ij} C_{ij} S_{i\lambda} S_{j\mu} = \omega_\lambda^2 \delta_{\lambda\mu} \quad (4.14)$$

で定義すると H は次のようになる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \dot{\xi}_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 \xi_{\lambda}^2 + \frac{1}{3!} \sum_{\lambda\mu\nu} D'_{\lambda\mu\nu} \xi_{\lambda} \xi_{\mu} \xi_{\nu} + \dots$$

但し

$$D'_{\lambda\mu\nu} = \sum_{ijk} D_{ijk} S_{i\lambda} S_{j\mu} S_{k\nu}$$

ここで量子論に移つて、フォノン演算子 $b_{\lambda}, b_{\lambda}^*$ を

$$\xi_{\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} (b_{\lambda}^* + b_{\lambda}), \quad \dot{\xi}_{\lambda} = i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\lambda}}{2}} (b_{\lambda}^* - b_{\lambda}), \quad [b_{\lambda}, b_{\mu}^*] = \delta_{\lambda\mu} \quad (4.15)$$

によつて導入すると結局ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} (b_{\lambda}^* b_{\lambda} + b_{\lambda} b_{\lambda}^*) + \frac{1}{3!} \sum_{\lambda\mu\nu} \sqrt{\frac{\hbar^3}{8\omega_{\lambda}\omega_{\mu}\omega_{\nu}}} D'_{\lambda\mu\nu} (b_{\lambda}^* + b_{\lambda}) \times (b_{\mu}^* + b_{\mu})(b_{\nu}^* + b_{\nu}) + \dots \quad (4.16)$$

となる。簡単のために

$$f_{\lambda\mu\nu} \equiv \sqrt{\frac{\hbar^3}{8\omega_{\lambda}\omega_{\mu}\omega_{\nu}}} D'_{\lambda\mu\nu}, \quad \bar{f}_{\lambda\mu\nu} = \frac{1}{3} (f_{\lambda\mu\nu} + f_{\mu\lambda\nu} + f_{\mu\nu\lambda}) \quad (4.17)$$

とおけば、 $b_{\lambda}, b_{\lambda}^*$ に対する運動方程式は次で与えられる。

$$i \frac{db_{\lambda}}{dt} = \omega_{\lambda} b_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \bar{f}_{\lambda\mu\nu} (b_{\mu}^* + b_{\mu})(b_{\nu}^* + b_{\nu})$$

$$i \frac{db_{\lambda}^*}{dt} = -\omega_{\lambda} b_{\lambda}^* - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \bar{f}_{\lambda\mu\nu} (b_{\mu}^* + b_{\mu})(b_{\nu}^* + b_{\nu}) \quad (4.18)$$

さてこの系のグリーン函数を計算するのであるが、問題をはつきりさせるために、例えば振動電場に対する系のレスポンスを調べることにして、双極子能率 P の相関 $\langle\langle P(t): P(t') \rangle\rangle$ を考える。 i 番目の振子の有効電荷を e_i とすると

$$P = \sum_i e_i x_i = \sum_i \frac{e_i}{\sqrt{m_i}} y_i = \sum_{i\lambda} \frac{e_i}{\sqrt{m_i}} S_{i\lambda} \xi_\lambda = \sum_\lambda \eta_\lambda (b_\lambda^* + b_\lambda)$$

$$\eta_\lambda \equiv \sum_i e_i S_{i\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_i \omega_\lambda}}$$

であるから必要なグリーン函数は

$$\begin{aligned} \langle\langle P(t):P(t') \rangle\rangle &= \sum_\lambda \sum_\mu \eta_\lambda \eta_\mu \{ \langle\langle b_\lambda^*: b_\mu^* \rangle\rangle + \langle\langle b_\lambda^*: b_\mu \rangle\rangle \\ &\quad + \langle\langle b_\lambda: b_\mu^* \rangle\rangle + \langle\langle b_\lambda: b_\mu \rangle\rangle \} \end{aligned}$$

の形のものである。振動数 ω の光の吸収を扱うようなときは、このフーリエ変換

$$I(\omega) = \sum_\lambda \sum_\mu \eta_\lambda \eta_\mu \{ \langle\langle b_\lambda^*: b_\mu^* \rangle\rangle_\omega + \langle\langle b_\lambda^*: b_\mu \rangle\rangle_\omega + \langle\langle b_\lambda: b_\mu^* \rangle\rangle_\omega + \langle\langle b_\lambda: b_\mu \rangle\rangle_\omega \}$$

が求まればよいが、対称性(2.19)によつて

$$\langle\langle b_\lambda^*: b_\mu \rangle\rangle_\omega = \langle\langle b_\mu: b_\lambda^* \rangle\rangle_{-\omega} \quad \langle\langle b_\lambda: b_\mu \rangle\rangle_\omega = \langle\langle b_\mu^*: b_\lambda^* \rangle\rangle_{-\omega}$$

の関係があるので結局 $\langle\langle b_\lambda: b_\mu^* \rangle\rangle_\omega$ と $\langle\langle b_\lambda: b_\mu \rangle\rangle_\omega$ がわかればよい。もし非調和振動の影響が非常に小さいとき、元のハミルトニアンと各フォノンの数 $b_\lambda^* b_\lambda$ とは近似的に可換であり、選択則によつて上記グリーン函数の中 $\langle\langle b_\lambda: b_\mu \rangle\rangle_\omega$ 型のもの、 $\lambda \neq \mu$ に対する $\langle\langle b_\lambda: b_\mu^* \rangle\rangle_\omega$ の型のものは非常に小さいはずであるから、残るのは

$$G_\lambda(\omega) = \langle\langle b_\lambda: b_\lambda^* \rangle\rangle_\omega$$

だけになる。実際の場合には光学的に活性な唯一つ又は少数の λ だけが光の吸収に参与する。

$\hbar=1$ に選んで(4.18)から $G_\lambda(\omega)$ に対する方程式を作ると

$$\omega G_\lambda(\omega) = 1 + \omega_\lambda G_\lambda(\omega) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} f_{\lambda\mu\nu} \langle\langle (b_\mu^* + b_\mu)(b_\nu^* + b_\nu) : b_\lambda^* \rangle\rangle \quad (4.19)$$

この右辺第三項に現われた新しい高次のグリーン函数に対する方程式を同様にして作ると

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle b_\mu^* b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle &= -(\omega_\mu + \omega_\nu) \langle\langle b_\mu^* b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle - \frac{1}{2} \sum_{\mu'\nu'} \{ \bar{f}_{\mu\mu'\nu'} \langle\langle (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) : b_\lambda^* \rangle\rangle \\ &\quad \times (b_\nu^* + b_{\nu'}) b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle + \bar{f}_{\nu\mu'\nu'} \langle\langle b_\mu^* (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) : b_\lambda^* \rangle\rangle \} \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle b_\mu^* b_\nu : b_\lambda^* \rangle\rangle &= -(\omega_\mu - \omega_\nu) \langle\langle b_\mu^* b_\nu : b_\lambda^* \rangle\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mu'\nu'} \{ \bar{f}_{\mu\mu'\nu'} \langle\langle (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) b_\nu : b_\lambda^* \rangle\rangle \\ &\quad - \bar{f}_{\nu\mu'\nu'} \langle\langle b_\mu^* (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) : b_\lambda^* \rangle\rangle \} \end{aligned}$$

等の如くなる。又新しく現われた高次グリーン函数に対して方程式を作ると、際限なく方程式の鎖は続くことになるから、どこかでこの鎖を切らなければならぬ。一つの近似として(4.20)の右辺に現われたグリーン函数をより低次のものですりかえる。例えば

$$\begin{aligned} \langle\langle (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong \langle\langle (b_\mu^* + b_{\mu'}) b_\nu^* \rangle\rangle \langle\langle b_{\nu'} : b_\lambda^* \rangle\rangle \\ &\quad + \langle\langle (b_\nu^* + b_{\nu'}) b_\nu^* \rangle\rangle \langle\langle b_{\mu'} : b_\lambda^* \rangle\rangle = (\delta_{\mu'\nu} \delta_{\nu'\lambda} + \delta_{\nu'\nu} \delta_{\mu'\lambda}) \langle b_\nu b_\nu^* \rangle G_\lambda(\omega) \\ \langle\langle b_\mu^* (b_\mu^* + b_{\mu'}) (b_\nu^* + b_{\nu'}) : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong \langle\langle b_\mu^* (b_\mu^* + b_{\mu'}) \rangle\rangle \langle\langle b_{\nu'} : b_\lambda^* \rangle\rangle \\ &\quad + \langle\langle b_\mu^* (b_\nu^* + b_{\nu'}) \rangle\rangle \langle\langle b_{\mu'} : b_\lambda^* \rangle\rangle = (\delta_{\mu'\mu} \delta_{\nu'\lambda} + \delta_{\nu'\mu} \delta_{\mu'\lambda}) \langle b_\mu^* b_\mu \rangle G_\lambda(\omega) \end{aligned}$$

等

この高次グリーン函数を低次グリーン函数に分解する際，常に不明確さに悩まされる。あらゆる可能な分解を採る方針で臨んだとしても， $\langle\langle\cdots\rangle\rangle$ の中の演算子の順序を積に分解するときどのように選ぶのがよいのか，近似が物理的な根拠に基づいてなされないのではつきりしない。この点については後程詳しく議論するが，今の場合比較的この不明確さは少くて，結局(4.20)から次のような近似式を導くことができる。

$$\begin{aligned}
 (\omega+\omega_\mu+\omega_\nu) \langle\langle b_\mu^* b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong -f_{\lambda\mu\nu}^s (n_\mu+n_\nu+1) G_\lambda(\omega) \\
 (\omega+\omega_\mu-\omega_\nu) \langle\langle b_\mu^* b_\nu : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong f_{\lambda\mu\nu}^s (n_\mu-n_\nu) G_\lambda(\omega) \\
 (\omega-\omega_\mu+\omega_\nu) \langle\langle b_\mu b_\nu^* : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong -f_{\lambda\mu\nu}^s (n_\mu-n_\nu) G_\lambda(\omega) \\
 (\omega-\omega_\mu-\omega_\nu) \langle\langle b_\mu b_\nu : b_\lambda^* \rangle\rangle &\cong f_{\lambda\mu\nu}^s (n_\mu+n_\nu+1) G_\lambda(\omega)
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

ただし

$$\begin{aligned}
 f_{\lambda\mu\nu}^s &= \frac{1}{2} (\bar{f}_{\mu\lambda\nu} + \bar{f}_{\mu\nu\lambda}) = \frac{1}{6} (f_{\mu\lambda\nu} + f_{\lambda\mu\nu} + f_{\lambda\nu\mu} + f_{\mu\nu\lambda} + f_{\nu\mu\lambda} + f_{\nu\lambda\mu}) \\
 n_\mu &= \langle b_\mu^* b_\mu \rangle
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

この結果を(4.19)に持込むと

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \bar{f}_{\lambda\mu\nu} \langle\langle (b_\mu^* + b_\mu)(b_\nu^* + b_\nu) : b_\lambda^* \rangle\rangle &\equiv \Sigma_\lambda(\omega) G_\lambda(\omega) \\
 &= \sum_{\mu\nu} (f_{\lambda\mu\nu}^s)^2 \left[\frac{n_\mu+n_\nu+1}{\omega^2 - (\omega_\mu+\omega_\nu)^2} + \frac{(n_\nu-n_\mu)(\omega_\mu-\omega_\nu)}{\omega^2 - (\omega_\mu-\omega_\nu)^2} \right] G_\lambda(\omega)
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

となり $G_\lambda(\omega)$ として

$$G_\lambda(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_\lambda - \Sigma_\lambda(\omega)} \tag{4.24}$$

が得られる。 $\Sigma_\lambda(\omega)$ を実数部分と虚数部分に分けて

$$\Sigma_\lambda(\omega) = \Delta_\lambda(\omega) - i \Gamma_\lambda(\omega) \quad (4.25)$$

とすると

$$\begin{aligned} \Gamma_\lambda(\omega) = & \frac{\pi}{2} \sum_{\mu\nu} (f_{\lambda\mu\nu}^s)^2 \left[(n_\mu + n_\nu + 1) \{ \delta(\omega - \omega_\mu - \omega_\nu) - \delta(\omega + \omega_\mu + \omega_\nu) \} \right. \\ & \left. + (n_\nu - n_\mu) \{ \delta(\omega - \omega_\mu + \omega_\nu) - \delta(\omega + \omega_\mu - \omega_\nu) \} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

となる。唯一つの光学的活性なモード λ があるときの光の吸収は $G_\lambda(\omega)$ の虚数部分

$$I_\lambda(\omega) = \frac{2 \Gamma_\lambda(\omega)}{(\omega - \omega_\lambda - \Delta_\lambda)^2 + \Gamma_\lambda^2(\omega)} \quad (4.27)$$

に比例する。 $\Gamma_\lambda(\omega)$ が ω に余りよらなければ、これは Lorentz 型曲線で、その巾は近似的に $\Gamma_\lambda(\omega_\lambda)$ で与えられる。もし ω_λ が振子系中最大の振動数にあたる場合には $\omega_\lambda + \omega_\mu + \omega_\nu = 0$, $\omega_\lambda - \omega_\mu + \omega_\nu = 0$, $\omega_\lambda + \omega_\mu - \omega_\nu = 0$ をみたすような ω_μ , ω_ν は存在しないため

$$\Gamma_\lambda(\omega_\lambda) = \frac{\pi}{2} \sum_{\mu\nu} (f_{\lambda\mu\nu}^s)^2 (n_\mu + n_\nu + 1) \delta(\omega_\lambda - \omega_\mu - \omega_\nu) \quad (4.28)$$

となる。この結果は普通の damping theory や Kubo theory で計算したものと同じである。 $\Sigma_\lambda(\omega)$ には振動子の振動数分布が敏感に利いて ω 依存性が単純でなくなることがあるので、吸収曲線は単純な Lorentz 型からはずれる可能性がある。

(iii) Damping Theory との関係

Damping theory との関係をもう少し一般的に見るために、調和振子系をはなれて次のようなモデルを考える。系内に振動数 ω_0 をもつたある振動

(フォノン・スピン波・プラズマ等)が存在し、それを適当な方法で励起して観測する。この振動量子の創生および消滅演算子をそれぞれ A^* , A とすれば、グリーン函数

$$G(t-t') = \langle\langle A(t): A^*(t') \rangle\rangle \text{ あるいはそのフーリエ成分}$$

$$G(\omega) = \langle\langle A: A^* \rangle\rangle_{\omega}$$

によつてこの観測結果が記述される。系のハミルトニアン H はこの振動を支える部分 H_0 と乱す部分 H_1 に分けられる:

$$H = H_0 + H_1$$

H_0 は

$$[A, H_0] = \omega_0 A \quad (4.29)$$

で定義される。これに対して H_1 は“雑音”の集りで H_0 によつて次のようにフーリエ分解できるものとする:

$$H_1 = \sum_{\alpha} H_1^{\alpha}, \quad [H_1^{\alpha}, H_0] = \omega_{\alpha} H_1^{\alpha} \quad (4.30)$$

A に対する運動方程式は

$$i \frac{dA}{dt} = [AH] = \omega_0 A + [A, H_1] \quad (4.31)$$

であるから $G(\omega)$ に対する方程式は

$$\omega G(\omega) = 1 + \omega_0 G(\omega) + \sum_{\alpha} \langle\langle [AH_1^{\alpha}]: A^* \rangle\rangle_{\omega} \quad (4.32)$$

となる。 $\langle\langle [A, H_1^{\alpha}]: A^* \rangle\rangle_{\omega}$ に対する方程式を作ると

$$\omega \langle\langle [A, H_1^{\alpha}]: A^* \rangle\rangle_{\omega} = \langle\langle [A, H_1^{\alpha}] H_0: A^* \rangle\rangle_{\omega} + \sum_{\beta} \langle\langle [A, H_1^{\alpha}] H_1^{\beta}: A^* \rangle\rangle_{\omega} \quad (4.33)$$

これに (4.29)(4.30) を用いると容易に

$$[[A, H_1^\alpha], H_0] = (\omega_0 + \omega_\alpha) [A, H_1^\alpha]$$

が確かめられるから

$$(\omega - \omega_0 - \omega_\alpha) \ll [A, H_1^\alpha] : A^* \gg_\omega = \sum_\beta \ll [[A, H_1^\alpha], H_1^\beta] : A^* \gg_\omega \quad (4.34)$$

が得られる。 $[[A, H_1^\alpha], H_1^\beta]$ には種々のモードが重なつて現われているのであろうが，その中から A に比例する部分だけとり出して他を無視すると Damping theory (二次の程度近似における) になる。すなわち

$$[[A, H_1^\alpha], H_1^\beta] \cong f_{\alpha\beta} A$$

あるいは A^* をかけて期待値をとり

$$\langle [[A, H_1^\alpha], H_1^\beta] A^* \rangle \cong f_{\alpha\beta} \langle A A^* \rangle \quad (4.35)$$

とすると

$$\ll [A, H_1^\alpha] : A \gg_\omega = \sum_\beta \frac{f_{\alpha\beta}}{\omega - \omega_0 - \omega_\alpha} G(\omega) \quad (4.36)$$

従つて (4.32) から

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 - \Sigma_0(\omega)} \quad (4.37)$$

$$\Sigma_0(\omega) = \sum_\alpha \sum_\beta \frac{f_{\alpha\beta}}{\omega - \omega_0 - \omega_\alpha} = \Delta_0(\omega) - i \Gamma_\alpha(\omega) \quad (4.38)$$

が導かれる。又 $\Delta_0(\omega)$, $\Gamma_\alpha(\omega)$ は (4.35) を参照して

$$\begin{aligned} \langle A A^* \rangle \Delta_0(\omega) &= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{\langle [[A, H_1^\alpha], H_1^\beta] A^* \rangle}{\omega - \omega_0 - \omega_\alpha} \\ \langle A A^* \rangle \Gamma_\alpha(\omega) &= \sum_\alpha \sum_\beta \langle [[A, H_1^\alpha], H_1^\beta] A^* \rangle \delta(\omega - \omega_0 - \omega_\alpha) \end{aligned} \quad (4.39)$$

の形に与えられる。

§ 5 Quantum Plasma

グリーン関数の鎖を近似的に切断するもう一つの例題として、一様な正電気の場の中にちょうど正電気を中和するだけの電子の気体がある場合を考える。電子間のクーロン力だけ考慮すると電子ガスのハミルトニアンは V を体積として

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^* a_k + \frac{1}{2V} \sum_{k_1 k_2} \sum'_q v(q) a_{k_1}^* a_{k_2}^* a_{k_2-q} a_{k_1+q}$$

$$v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad \sum'_q \text{は } q=0 \text{ を除く} \quad (5.1)$$

従つて a_k, a_k^* に対する運動方程式は

$$i \frac{da_k}{dt} = \varepsilon_k a_k + \frac{1}{V} \sum_{k,q} v(q) a_{k_1}^* a_{k_1-q} a_{k+q}$$

$$i \frac{da_k^*}{dt} = -\varepsilon_k a_k^* + \frac{1}{V} \sum_{k,q} v(q) a_{k_1}^* a_{k_1-q} a_{k+q}^* a_{k_1} \quad (5.2)$$

となる。これからグリーン関数

$$G_k(\omega) = \langle\langle a_k : a_k^* \rangle\rangle_\omega$$

に対する方程式を作ると

$$\omega G_k(\omega) = 1 + \varepsilon_k G_k(\omega) + \frac{1}{V} \sum_{k'} \sum_q v(q) \langle\langle a_{k'}^* a_{k'-q} a_{k+q} : a_k^* \rangle\rangle_\omega \quad (5.3)$$

が得られるが、ここで右辺第三項のグリーン関数を近似して

$$\langle\langle a_{k'}^* a_{k'-q} a_{k+q} : a_k^* \rangle\rangle \cong \langle a_{k'}^* a_{k'-q} \rangle \langle\langle a_{k+q} : a_k^* \rangle\rangle$$

$$- \langle a_{k'}^* a_{k+q} \rangle \langle\langle a_{k'-q} : a_k^* \rangle\rangle = -\delta_{k', k+q} \langle n_{k+q} \rangle G_k(\omega) \quad (5.4)$$

とすると Hartree-Fock 近似の解が結果する。実際 (5.4) を (5.3) に入
れると

$$\varepsilon_k^{\text{ex}} = \varepsilon_k - \frac{1}{V} \sum_q' v(q) \langle n_{k+q} \rangle \quad (5.5)$$

として

$$G_k(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k^{\text{ex}}} \quad (5.6)$$

となるから、これはエネルギースペクトル $\varepsilon_k^{\text{ex}}$ をもつ独立粒子の集りと同
等である。 $\varepsilon_k^{\text{ex}}$ の中には一次の補正で交換相互作用が入っている。しかしク
ーロン斥力そのものを $v(q)$ に用いると $\varepsilon_k^{\text{ex}}$ は発散する。本当は (5.4) の
近似で落された電子間の二体相関効果によつてはだかのクーロン斥力はスク
リーンされて発散は防がれるのである。故に (5.4) で無視した部分を拾つ
て

$$\langle\langle a_{k'}^* a_{k'-q} a_{k+q} : a_k^* \rangle\rangle = -\delta_{k, k+q} \langle n_{k+q} \rangle G_k(\omega) + g_{k', k'-q, k+q; k}(\omega) \quad (5.7)$$

とおき $g_{k', k'-q, k+q; k}(\omega)$ に対する方程式を作る。以下記号を簡単にする
ため ω は省略し

$$g_{k', k'-q, k+q; k}(\omega) = g(k', k'-q, k+q | k) \quad (5.8)$$

$$\langle\langle a_{k_1}^* a_{k_2}^* a_{k_3} a_{k_4} a_{k_5} : a_k^* \rangle\rangle = G(k_1 k_2; k_3 k_4 k_5 | k)$$

等と書くと

$$\begin{aligned} & (\omega - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{k'-q} + \varepsilon_k) g(k', k'-q, k+q | k) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{q'}' v(q') \{ G(k', k'-q+q', k+q-q' | k) - \delta_{k, k'-q} \langle n_{k+q} \rangle \sum_{k_1} G(k_1+q'; k_1, k+q' | k) \} \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{k_1 q'}' v(q') \{ -G(k_1-q', k'; k_1, k'-q, k+q-q' | k) + G(k_1-q', k'-q'; k_1, k'-q, k+q | k) \\ &\quad - G(k_1-q', k'; k_1, k'-q-q', k+q | k) \} \end{aligned} \quad (5.9)$$

この右辺を近似して低次のグリーン函数で表わす。 $G(k_1; k_2 k_3 | k)$ の型のものに対しては (5.7) を用い $G(k_1 k_2; k_3 k_4 k_5 | k)$ の型のものに対しては

$$G(k_1 k_2; k_3 k_4 k_5 | k) \cong \sum \pm \langle a^* a^* a a \rangle G(k | k) \\ + \sum \pm \langle a_1^* a_2 \rangle g(k_2; k_4 k_5 | k)$$

のようにあらゆる可能な分解を考える。こうすれば (5.9) は $g(k_1; k_2 k_3 | k)$ を $G(k | k)$ で表わすための一つの積分方程式になるがそのままでは解くことはできない。詳細は省くが適当に近似すると

$$(\omega - \varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_{k'}) g(k'; k'-q, k+q | k) = \frac{1}{V} v(q) \langle n_{k+q} \rangle (\langle n_{k'-q} \rangle - \langle n_{k'} \rangle) G(k | k) \\ + \frac{v(q)}{V} \{ \langle n_{k'} \rangle - \langle n_{k'-q} \rangle \} \sum_{k_1} g(k_1+q; k_1, k+q | k)$$

の形に帰着できこれを解いて

$$\sum_{k'} g(k'; k'-q, k+q | k) = \left\{ \frac{1}{1 - \frac{v(q)}{V} \sum_k \frac{\langle n_{k'} \rangle - \langle n_{k'-q} \rangle}{\omega - \varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_{k'}}} - 1 \right\} \langle n_{k+q} \rangle G(k | k) \\ \equiv \left\{ \frac{1}{\epsilon(q, \omega - \varepsilon_{k+q})} - 1 \right\} \langle n_{k+q} \rangle G(k | k) \quad (5.10)$$

を得る。これと (5.3) を組合せると

$$G_k(\omega) = \frac{1}{\omega - E_k^{\text{ex}}} \quad (5.11)$$

$$E_k^{\text{ex}} = \varepsilon_k - \frac{1}{V} \sum_q' \frac{v(q)}{\epsilon(q, \omega - \varepsilon_{k+q})} \langle n_{k+q} \rangle \quad (5.12)$$

となつて、ちょうどクーロンポテンシャルが $1/\epsilon$ 倍だけスクリーン効果で弱められたときの、交換作用を補正したエネルギー・スペクトルをもつ粒子に対するグリーン函数の形になる。(5.10) で定義された $\epsilon(q, \omega)$ が上記の近似の範囲で電子ガスの誘電率を表わすことを証明することも可能であるがここには省略する。